

REUNIÓN ANUAL DE LA SOCIEDAD NUCLEAR
ESPAÑOLA 2008
Área temática de I+D+i

El código nodal analítico *ANDES* para difusión en geometría 3D y multi-grupos: Desarrollo y Resultados

Juan Andrés Lozano^a, Nuria García-Herranz, José M^a Aragonés

Departamento de Ingeniería Nuclear, Universidad Politécnica de Madrid (UPM)

C/ José Gutiérrez Abascal, 2; 28006 Madrid

1. Introducción

La necesidad de métodos computacionales cada vez más exactos para la simulación de los fenómenos físicos presentes en los reactores nucleares actuales y futuros, requiere una aproximación multi-escala y multi-física. Este reto puede ser realizado mediante el acoplamiento de códigos *best-estimate* de neutrónica y termo-hidráulica. Con este objetivo, la tendencia actual en el campo de simulación de reactores es el desarrollo de una nueva generación de herramientas que sean fáciles de usar, modulares, intercambiables y de esta manera, integrables en plataformas comunes. Estas son las premisas que dieron lugar al proyecto integrado NURESIM dentro del 6º Programa Marco de la Unión Europea (Cacuci et al., 2006). En el marco de este proyecto se ha desarrollado y **validado** un código nodal de difusión tridimensional en multi-grupos llamado *ANDES* (*Analytic Nodal Diffusion Equation Solver*) (Lozano et al., 2007).

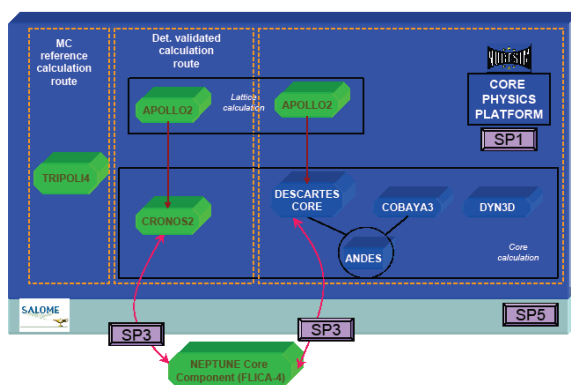


Figura 1. Conjunto de códigos neutrónicos incluidos en el proyecto NURESIM

El código *ANDES* resuelve la ecuación de difusión neutrónica en geometría Cartesiana (LWR) o geometría Triangular-Z (VVER, HTGR, SFR) en tres dimensiones y multi-grupos de energía. Para ello utiliza el método Analítico en Malla Gruesa y Diferencias

^a Primer autor, lozano@din.upm.es
Tel: +34 91 336 3108; Fax: +34 91 336 3102

Finitas (ACMFD) (Aragonés et al., 2007) para obtener las ecuaciones de acoplamiento nodal. Esta metodología, originalmente introducida por Y.A. Chao (Chao, 1999, 2000) para la ecuación de difusión estacionaria ha sido extendida para la ecuación cinética (Lozano et al., 2008), lo que permite no sólo el cálculo de estados estacionarios, sino también de transitorios originados por un cambio en las condiciones neutrónicas o termohidráulicas. Para la simulación de transitorios, así como de estacionarios a potencia, se ha llevado a cabo el acoplamiento de *ANDES* con el código termohidráulico *COBRA* (Jiménez et al., 2007).

Es destacable el gran esfuerzo realizado en dotar al código de una estructura que lo convierta en una herramienta fácilmente integrable, lo que ha permitido la integración del mismo en nuestro código 3D de celda *COBAYA3* (Herrero et al., 2007), así como en la nueva plataforma *DESCARTES* (Calvin et al., 2005).

2. Método Nodal Analítico en Malla Gruesa y Diferencias Finitas

El objetivo del método ACMFD, al igual que el del resto de métodos nodales, es resolver la ecuación de difusión neutrónica en malla gruesa. Si se plantea la ecuación de balance neutrónico en cada nodo, las incógnitas que aparecen son el flujo medio y las corrientes medias de interfase por grupo de energía. Para obtener un sistema lineal con los flujos medios por nodo y grupo de energía como únicas incógnitas, es necesaria una expresión adicional que relacione las corrientes en cada interfase con los flujos medios de los nodos adyacentes. Es en dicha relación, llamada ecuación de acoplamiento, donde difieren la mayoría de los métodos nodales.

- Algunos métodos modifican el esquema estándar de diferencias finitas introduciendo una corrección no lineal a través de coeficientes de acoplamiento. Usando métodos nodales de alto orden (NEM, ANM), se resuelve el llamado “problema de dos nodos” para cada interfase nodal, proporcionando una estimación más exacta de la corriente media en dicha interfase. Estas corrientes se usan para actualizar los coeficientes de acoplamiento.
- Otros métodos no modifican los coeficientes de acoplamiento, sino el gradiente de flujo en las interfases, introduciendo factores de discontinuidad obtenidos de los cálculos de elemento aislado. Estos factores modifican localmente el flujo en las interfases, constituyendo un procedimiento de diferencias finitas discontinuo.
- El método ACMFD proporciona una ecuación de acoplamiento de forma analítica, incluyendo los efectos espectrales y de malla gruesa sin la necesidad de usar ningún tipo de factores de corrección sintéticos.

El método implementado en *ANDES* se basa en una expansión analítica del flujo en el interior de cada nodo. Para obtener dicha expansión analítica es preciso someter al sistema de ecuaciones de difusión en multi-grupos a dos transformaciones:

1. Dado que las G ecuaciones de difusión para G grupos de energía están acopladas entre sí, constituyendo un sistema lineal de ecuaciones diferenciales, se realiza una diagonalización del mismo, obteniéndose un conjunto equivalente de G ecuaciones llamadas modales, donde las incógnitas serán los flujos modales, los cuales están relacionados linealmente con los flujos físicos.

Con formato: Español
(España - alfab. internacional)

2. Puesto que en geometrías 2D y 3D tenemos un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales cuya solución analítica no es cerrada, se emplea el procedimiento de integración transversal para obtener una ecuación diferencial sobre el flujo integrado transversalmente en cada dirección. Dichas ecuaciones por cada dirección se encuentran acopladas a través de un término de fuente externa llamado fuga transversal, para el cual se asume un perfil en el interior del nodo.

El error cometido en el método ACMFD es debido a la diferencia existente entre el perfil real de las fugas transversales, el cual depende de la distribución de corrientes en las interfaces nodales (desconocido), y el perfil obtenido por la interpolación de los valores medios de las corrientes en las interfaces nodales (conocidos). En *ANDES* se han implementado tres tipos de interpolación: *plana*, *parabólica* y *cúbica*, analizándose en secciones posteriores la influencia de cada aproximación en la exactitud del resultado.

Con toda esta metodología se obtiene finalmente la siguiente relación matricial entre el flujo medio en una interfase, la corriente media en la misma y el flujo medio en el nodo adyacente:

$$|J_g\rangle = D A^{j-1} \frac{A^f |\bar{\phi}_g\rangle - |\phi_g^s\rangle}{H/2}$$

Donde $|J_g\rangle$, $|\phi_g^s\rangle$ y $|\bar{\phi}_g\rangle$ son los vectores columna de corriente media de interfase, flujo medio de interfase y flujo medio nodal por grupo de energía. D es la matriz diagonal ($G \times G$) de los coeficientes de difusión, A^f y A^j son matrices ($G \times G$) completas, obtenidas a partir del desarrollo analítico y H es la anchura del nodo en la dirección considerada. Aplicando esta relación desde los dos nodos adyacentes a una interfase y considerando que flujo y corriente son continuos en dicha interfase, obtendremos finalmente la ecuación de acoplamiento nodal.

3. Implementación del código *ANDES*

En este apartado, se comentan los elementos clave en la implementación de la metodología previamente explicada en el código de difusión nodal analítico *ANDES*. Este código, escrito en FORTRAN 90, se compone de un conjunto de subrutinas, cada una de las cuales está orientada a ejecutar una tarea concreta. La eficiencia del código depende del flujo de cálculo, así como de la estructura de cada subrutina, realizándose un esfuerzo importante en ambos aspectos.

Asimismo se ha prestado una atención especial a la gestión del flujo de datos, con dos objetivos: por un lado, minimizar el uso de memoria estática, por el otro, encapsular todas las variables de interfase de *ANDES* (entrada y salida), facilitando así la capacidad de integración del código en otros sistemas de códigos con diferentes estructuras o incluso distinto lenguaje de programación.

A continuación se detalla el esquema del flujo de cálculo del código *ANDES* para el problema de valor propio en estados estacionarios.

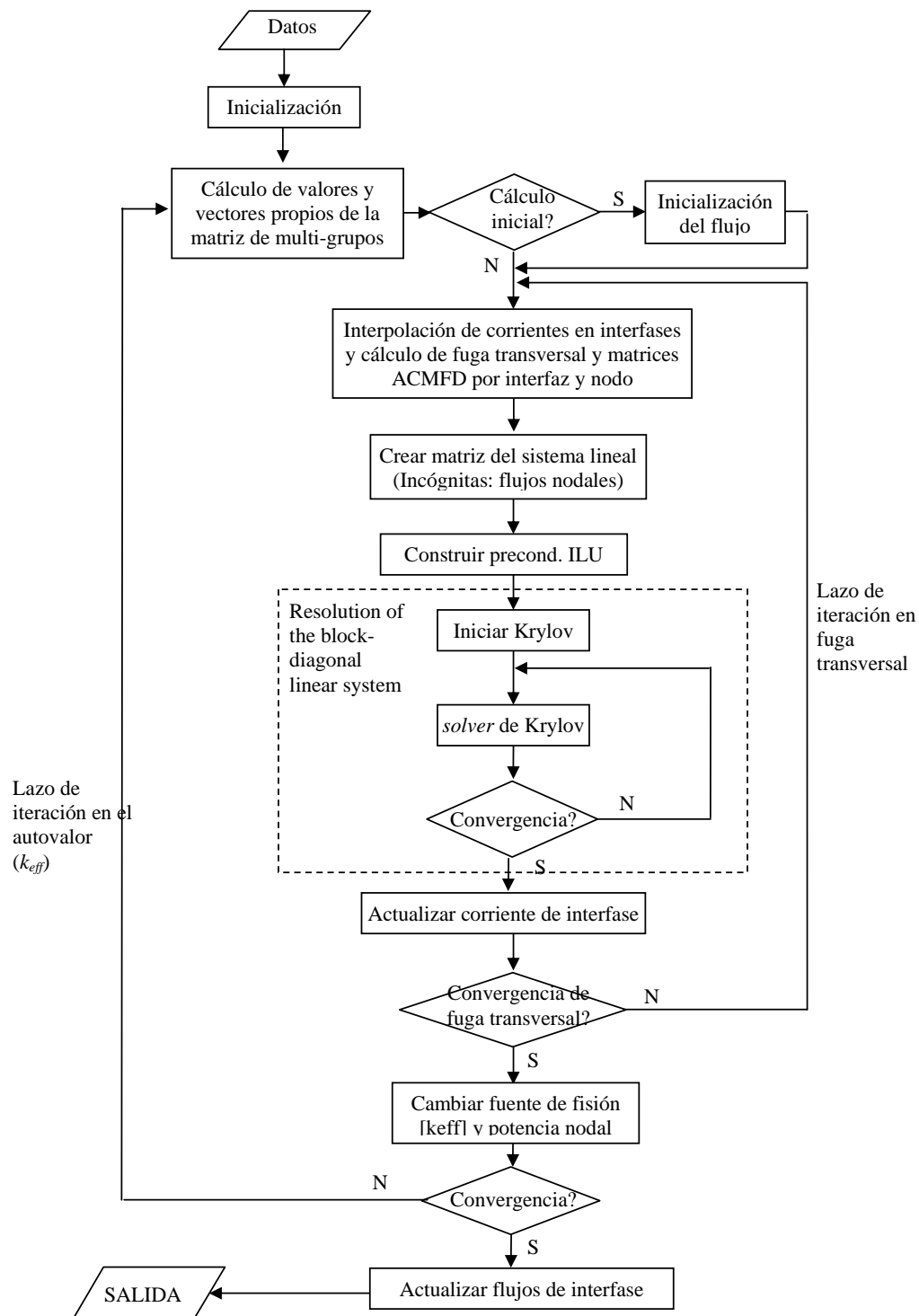


Figura 2. Esquema de cálculo iterativo para el problema de valor propio

4. Resultados

Durante el proceso de verificación del código *ANDES* se ha realizado un extenso conjunto de ejercicios numéricos, los cuales van desde pruebas de auto-convergencia con geometrías sencillas hasta *benchmarks* internacionales para núcleos PWR, con realimentación termohidráulica de las secciones eficaces y definición de estados estacionarios y transitorios.

La Tabla 1 muestra una lista de los *benchmarks* realizados así como de los resultados más reseñables.

Tabla 1: Resumen de los resultados de *ANDES* para diferentes *benchmarks*, con cuatro nodos por elemento combustible y dos grupos de energía.

<i>Test / Benchmark</i>	Caso	Boro crítico (ppm) / K_{eff}	Error con la referencia (ppm)/(pcm)	F_{xy}	Error relativo (F_{xy}) (%)
2D PWR color-set benchmark	-	0.958780	2.7	1.1781	0.02
LWR core transient benchmarks (Finnemann et al., 1991)	A1	561.62	6.1	1.9109	0.10
	A2	1158.03	2.6	1.1997	0.14
	B1	1248.42	6.2	1.2760	0.00
	B2	1187.68	1.7	1.1723	0.20
	C1	1128.75	6.5	1.4440	0.07
	C2	1158.03	2.6	1.1997	0.14
PWR benchmark on uncontrolled rods withdrawal at zero power (Fraikin, 1997)	A	1262.4	0.3	1.243	0.08
	B	793.3	0.3	1.909	0.16
OCDE/NEA and U.S. NRC PWR MOX/UO ₂ core transient benchmark (Kozlowski et al., 2003)	1a	1.063792	0.6	1.682	0.04
	1c	0.991517	1.9	2.505	0.04
	2a	1685.93	6.6	1.370	0.6
	3a	1342.93	2.2	1.748	0.0
PWR Main Steam Line Break (MSLB) Benchmarks (Exercise 2) (Ivanov et al., 1999)	0	1.035521	182*	1.3630	0.15*
	1	1.033542	174*	1.4358	0.24*
	2	1.004086	19*	1.3293	1.79*
	3	0.987150	175*	5.4264	0.58*
	4	1.002067	187*	3.6212	0.25*

* En este *benchmark*, la referencia se refiere a la media de las soluciones dadas por los diferentes participantes.

Por razón de brevedad, en este artículo únicamente se detalla un ejercicio numérico, el cual se presenta como ejemplo de la gran precisión que ofrece el método ACMFD para mallas de pocos nodos por elemento combustible. Básicamente consiste en una composición 2D de elementos combustibles PWR llamada *color-set*. El objetivo de esta elección es mostrar también la ventaja de los métodos nodales de alto orden frente a los métodos estándar de diferencias finitas, así como la gran influencia de la aproximación (interpolación) de fugas transversales en la exactitud de los cálculos realizados con *ANDES*.

4.1. Color-set PWR en 2D

Una de las composiciones de elementos combustibles que más penalizan el uso de un perfil incorrecto de fugas transversales es el problema del *color-set* 2D, con dos tipos de elementos combustibles homogéneos, de 20 cm de anchura. Se considera un conjunto

de secciones eficaces típicas en 2 grupos de energía. En esta sección se comparan tres esquemas de interpolación distintos implementados en *ANDES*, con diferentes grados de refinamiento nodal para todos ellos. El objetivo de esta comparación es mostrar que la única fuente de error en la solución de la ecuación de difusión basada en el método ACMFD es la diferencia entre el perfil auténtico de la fuga transversal y el perfil interpolado a partir de los valores medios de las corrientes de interfase.

La Figura 3 muestra los errores absolutos obtenidos en la constante multiplicativa, no sólo para las soluciones de *ANDES* con interpolación plana, parabólica y cúbica, sino también para la solución de diferencias finitas en malla fina de *COBAYA3*. Respecto al grado de refinamiento, situado en el eje de abscisas de la gráfica, es preciso comentar que N significa que se han usado $N \times N$ nodos por elemento combustible (cálculos con *ANDES*) o $N \times N$ mallas por celda (17x17 celdas por elemento combustible en *COBAYA3*).

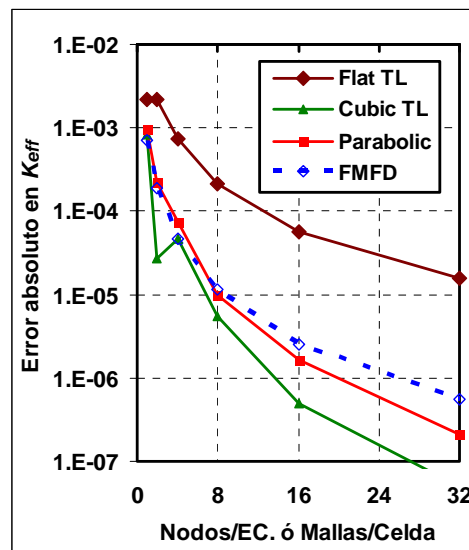


Figura 3. Error absoluto en K_{eff}

En el gráfico puede apreciarse que la solución con interpolación cúbica es casi dos órdenes de magnitud más precisa que la de interpolación plana, o equivalentemente se puede afirmar que con interpolación cúbica puede alcanzarse la misma precisión que con interpolación plana y una malla ocho veces más fina. Por otra parte, es necesario anotar que los cálculos con interpolación cúbica o parabólica no requieren un tiempo de cálculo adicional excesivo, perfilándose como opciones más ventajosas que la interpolación plana.

5. Conclusiones

ANDES es un código nodal basado en el método ACMFD que resuelve la ecuación de difusión en multi-grupos y tridimensional, tanto en estado estacionario como en su versión dependiente del tiempo. Puede aplicarse a geometrías Cartesiana y Triangular-Z, siendo apto para la simulación de núcleos tipo LWR así como tipo VVER, SFR y HTGR. Los resultados obtenidos en los ejercicios numéricos de verificación muestran que *ANDES* es un código de gran precisión y con alto orden de aproximación tanto en energía como en distribución espacial.

En cuanto al modo de funcionamiento, *ANDES* puede realizar cálculos de forma autónoma mediante el uso de secciones eficaces nodales (homogeneizadas por elemento combustible) y factores de heterogeneidad procedentes de librerías. También, al estar integrado en el código *COBAYA3*, puede ser empleado como un módulo para acelerar la convergencia de cálculos de difusión al nivel de la barra de combustible.

El conjunto de *tests* realizados con *ANDES* muestran una alta tasa de convergencia con respecto al refinamiento de la malla de un código basado en la formulación ACMFD. En general, para geometría Cartesiana, con 1x1 nodos por elemento combustible, el error absoluto en K_{eff} está por debajo de 50 pcm y el máximo error en potencia por elemento combustible no supera el 1%; con 2x2 nodos por elemento combustible estos valores decrecen hasta las 2 pcm y el 0.2%. Destaca en este sentido el hecho de que la formulación de *ANDES* logra (con 2x2 nodos por elemento combustible) un nivel de precisión para el que un esquema de diferencias finitas en malla fina requeriría 68x68 celdas por elemento combustible.

Respecto al tiempo de cálculo, se ha constatado que se mantiene proporcional al número de incógnitas del problema (nodos x nº de grupos de energía).

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la Comisión Europea bajo el sexto programa marco dentro del proyecto integrado NURESIM “European Platform for Nuclear Reactor Simulations”, con número de contrato 516560 (FI6O). El trabajo del primer autor forma parte del contenido de su tesis doctoral y ha sido cofinanciado por el citado proyecto europeo y por la Universidad Politécnica de Madrid, dentro del programa UPM de becas de doctorado cofinanciadas por proyectos de I+D+i europeos.

Referencias

- Aragonés, J.M., Ahnert, C., García-Herranz, N., 2007. The Analytic Coarse-Mesh Finite-Difference Method for Multigroup and Multidimensional Diffusion Calculations. *Nucl. Sci. Eng.* **157**, 1-15.
- Cacuci, D.G., Aragonés J.M., Bestion, D., Coddington, P., Dada, L., Chauliac, C., “NURESIM: A European Platform for Nuclear Reactor Simulation”, Proc. FISA 2006, Comisión Europea, Luxemburgo, 13-16 de Marzo, 2006.
- Calvin, C., 2005. DESCARTES: A New Generation System for Neutronic Calculations. Proc. Int. Conf. on Mathematics and Computation, M&C-2005, Avignon, France.
- Chao, Y.A., 1999. A Theoretical Analysis of the Coarse Mesh Finite Difference Representation in Advanced Nodal Methods, in *Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, J.M. Aragonés (Ed.), Vol. 1, 117-126, Senda Ed., Madrid.
- Chao, Y.A., 2000. Coarse Mesh Finite Difference Methods and Applications, in *Reactor Physics and Mathematics and Computation into the Next Millennium*, PHYSOR-2000, Vol.1, 9404, Am. Nuclear Soc., Pittsburgh.
- Finnemann, H., Galati, A., 1991. NEACRP 3-D LWR Core Transient Benchmarks. Final Specifications, *OECD/NEACRP-L-335*, Oct. 1991.
- Fraikin, R., 1997. PWR Benchmark on Uncontrolled Rods Withdrawal at Zero Power. Final Report, *NEA/NSC/DOC(96)20*, Sept. 1997.
- Herrero J.J., Ahnert C., Aragonés J.M., 2007, “3D Whole Core Fine Mesh Multigroup Diffusion calculations by Domain Decomposition through Alternate Dissections”, *M&C/SNA-2007*, Am. Nucl. Soc. Monterrey. California. EE.UU.
- Ivanov, K.N., Beam, T.M., Irani, A., Trikouros, N., 1999. Pressurized Water Reactor Main Steam Line Break (MSLB) Benchmark. Volume I: Final Specifications, *NEA/NSC/DOC(99)8*, Apr. 1999.
- Jiménez J., Cuervo D., Aragonés J.M., 2007 “Multi-scale and Multi-physics coupling in COBAYA3”, NURETH-12, Pittsburg, EE.UU.
- Kozlowski, T., Downar, T., 2003. OECD/NEA and U.S. NRC PWR MOX/UO₂ core transient benchmark. Final Specifications, Revision 2, *NEA/NSC/DOC(2003)20*, Dec. 2003.
- Lozano, J.A., Aragonés, J.M., García-Herranz, N., 2007, “Development and Performance of the Analytic Nodal Diffusion Solver ANDES in Multigroups for 3D Rectangular Geometry”, *M&C/SNA-2007*, Am. Nucl. Soc. Monterey.
- Lozano J.A., Aragonés J.M., García-Herranz N., 2008, “Transient Analysis in the 3D Nodal Kinetics and Thermal-Hydraulics ANDES/COBRA coupled system”, PHYSOR-2008, Interlaken, Suiza, 14-19 de Septiembre.